625—637 нм использовался краситель родамин Б, имеющий более высокий порог генерации, чем родамин 6Ж. Поэтому вместо двухзеркальной конфигурации резонатора (как в работе [1]) была выбрана стандартная трехзеркальная конфигурация, а для уменьшения паразитной селекции общая база резонатора была увеличена до 200 см. Практически порог генерации был 400 мВт, дополнительный селектор в резонаторе отсутствовал, а перестройка по спектру осуществлялась изменением расположения струи, мощности накачки, юстировки резонатора и другими известными методами.

На рисунке, представлен спектр поглощения атмосферного воздуха в диапазоне 625—637 нм. Всего было зарегистрировано 296 линий, из которых 195 было обнаружено впервые. Как и в работе [1], сравнение проводилось с таблицами солнечного спектра [3]. Чувствительность нашей установки по коэффициенту поглощения была не хуже 10^{-8} см$^{-1}$, а точность определения длины волны составляла 0.003 нм. Некоторые достаточно интенсивные линии, присутствующие в нашем спектре, отсутствуют в [3], вероятно, из-за сильного блендирования их солнечными линиями (линии с длинами волн 626.111, 626.228, 626.870, 627.024, 632.512, 633.608, 634.699 нм); наоборот другие линии, приведенные в [3] и отождествленные как атмосферные, в нашем спектре отсутствуют. Возможно наличие этих линий в [3] связано с поглощением в высоких слоях атмосферы или в солнечной короне.

Полная таблица длин волн, зарегистрированных нами линий, их идентификация и сравнительные интенсивности опубликована в [4].

Литература

[1] В. М. Баев, Т. П. Беликова, М. Б. Ипполитов, Э. А. Свириденков, А. Ф. Сучков. Препринт ФИАН № 31, 1978; Опт. и спектр., *45*, 58, 1978.

[2] В. М. Баев, Т. П. Беликова, Э. А. Свириденков, А. Ф. Сучков. ЖЭТФ, *74*, 43, 1978.

[3] C. E. Moore, M. G. Minnaert, J. Hautgast. The Solar Spectrum 2935 to 8700 Å. NBS, Monograph 61, Dec. 1966.

[4] В. М. Баев, Т. П. Беликова, С. А. Коваленко, Э. А. Свириденков, А. Ф. Сучков, Д. Д. Топтыгин. Ж. метрологии, № 3, 1980.

Поступило в Редакцию 13 февраля 1980 г.

УДК 539.194.01

СИММЕТРИЯ КВАЗИЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ НЕВЫРОЖДЕННОЙ ДВУХУРОВНЕВОЙ СИСТЕМЫ

П. А. Браун и *Г. П. Мирошниченко*

Двухуровневая система в периодическом поле — одно из основных приближений, используемых для описания взаимодействия излучения с веществом. Важной характеристикой этой модели является ее квазиэнергия, проявляющаяся, в частности, в спектрах поглощения и испускания [1]. Квазиэнергия двухуровневой системы изучалась аналитически и численно, например, в работах [2—4], экспериментально — в [5, 6], где получено хорошее согласие с теорией. В этой работе исследуются свойства квазиэнергий невырожденной (без поля) двухуровневой системы, следующие из симметрии задачи.

Общая постановка задачи на квазиэнергии известна [7]

$$\left[-i\,\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\Delta}{2}\,\hat{\sigma}_z-F\hat{V}(t)\right]\varphi_Q(t)=Q\varphi_Q(t). \qquad (1)$$

Здесь F — параметр взаимодействия (имеющий размерность частоты), Δ — частота перехода, $F\hat{V}(t)$ — периодичный оператор взаимодействия, $\varphi_Q(t)$ — периодичное квазиэнергетическое состояние (КЭС) с квазиэнергией Q, $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ — матрицы Паули.

В силу теоремы Вигнера—Неймана [8] собственные числа гамильтониана, не обладающего симметрией, не могут пересекаться при изменении параметров. Возможность пересечения связана с дополнительной симметрией задачи.

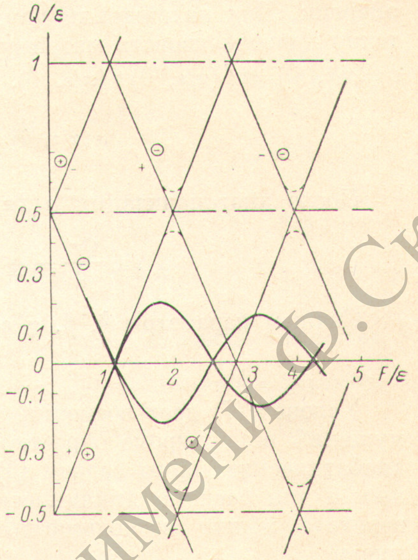
Рассмотрим взаимодействие с вращающейся волной

$$F\hat{V}(t) = F(\hat{\sigma}_x \cos \varepsilon t + \hat{\sigma}_y \sin \varepsilon t). \qquad (2)$$

Задача (1), (2) симметрична относительно преобразования

$$\hat{C} = \hat{T}\hat{\sigma}_z. \qquad (3)$$

Здесь $\hat{T}$ — сдвиг времени на полпериода поля, $\hat{\sigma}_z$ — оператор пространственной четности (в двухуровневом случае).



Квазиэнергии двухуровневой системы, формула (9), $\varepsilon = \Delta$.

Прямые наклонные линии — квазиэнергии в случае вращающегося поля, точный резонанс. Штриховыми линиями показано снятие вырождения квазиуровней с одинаковой $\hat{C}$-четностью на границах зон при учете малой антирезонансной добавки. Знаки «+» и «—» указывают $\hat{C}$-четность, знаки ⊕ и ⊖ — $\hat{R}$-четность.

Так как $\hat{C}^2 = 1$, то КЭС задачи (1), (2) обладают $\hat{C}$-четностью. Из легко проверяемых соотношений $\varphi_Q(t) = i\hat{\sigma}_y \varphi^*_{-Q}(t)$, $\varphi_Q(t) = \hat{C} i \hat{\sigma}_y \varphi^*_{-Q}(t)$ следуют следующие свойства КЭС задачи, имеющей $\hat{C}$-симметрию:

1) если есть $\{Q, \varphi_Q(t)\}$, то имеется и $\{-Q, \varphi_{-Q}(t)\}$ [2];

2) $\hat{C}$-четность $\hat{C}\varphi_Q(t) = \varphi_Q(t)$, $\hat{C}\varphi_{-Q}(t) = -\varphi_{-Q}(t)$.

Из рисунка видно, что на границах зон Бриллюэна [7]

$$\pm\varepsilon/2 + k\varepsilon, \quad k = 0, \ \pm 1, \ \pm 2 \ldots \qquad (4)$$

возможно пересечение квазиэнергий с одинаковой $\hat{C}$-четностью. Это пересечение связано с более высокой, чем $\hat{C}$, симметрией задачи (1), (2), связанной с делением переменных [8] (временная переменная отделяется от дискретной). Действительно, существует унитарный оператор $\hat{R}(t)$, коммутирующий с гамильтонианом задачи (1), (2), и учитывающий факт деления переменных

$$\hat{R}(t) = \Omega^{-1}\left(\frac{\Delta - \varepsilon}{2}\hat{\sigma}_z - Fe^{-i\varepsilon\hat{\sigma}_z t}\hat{\sigma}_x\right), \quad \Omega = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon - \Delta}{2}\right)^2 + F^2}, \quad \hat{R}^2(t) = 1.$$

Из рисунка видно, что квазиуровни с одинаковой $\hat{R}$-четностью не пересекаются (в согласии с теоремой Вигнера—Неймана). Добавка малого антирезонансного члена $\delta F(\hat{\sigma}_x \cos \varepsilon t - \hat{\sigma}_y \sin \varepsilon t)$, также имеющего $\hat{C}$-симметрию (но не имеющего $\hat{R}$-симметрии), снимает вырождение квазиуровней одинаковой $\hat{C}$-четности на границах зон (4). Имеем еще одно свойство КЭС, следующее из $\hat{C}$-симметрии:

3. квазиуровни не могут пересекать или касаться границ зон (4), но могут пересекаться внутри зон.

Получим приближенные выражения для квазиэнергий двухуровневой системы в линейно поляризованном поле $F\hat{V}(t) = F\cos\varepsilon t\, \hat{\sigma}_x$. Для этого, сделав замену базиса $|0\rangle \to (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, $|1\rangle \to (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$, найдем оператор развития на период поля $v(2\pi/\varepsilon, 0)$ задачи

$$i\dot{v}(t, 0) = \left(F\cos \varepsilon t\,\hat{\sigma}_z - \frac{\Delta}{2}\hat{\sigma}_x\right) v(t, 0). \tag{5}$$

В силу периодичности оператор $v(t, 0)$ представим в виде $v(t, 0) = u(t, 0)\,e^{-i\hat{Q}t}$, где $u(t, 0)$ — периодичный оператор, $\hat{Q}$ — оператор квазиэнергии. Для нахождения двух собственных чисел $\pm Q$ оператора $\hat{Q}$ достаточно диагонализовать матрицу $v(2\pi/\varepsilon, 0)$, воспользовавшись соотношением: $v(2\pi/\varepsilon, 0) = v^T(\pi/\varepsilon, 0)\,v(\pi/\varepsilon, 0)$. Общий вид унитарной матрицы $v(\pi/\varepsilon, 0)$

$$v(\pi/\varepsilon, 0) = \begin{pmatrix} \cos\delta e^{i\gamma}, & -\sin\delta e^{-i\beta} \\ \sin\delta e^{i\beta}, & \cos\delta e^{-i\gamma} \end{pmatrix}.$$

После диагонализации $v(2\pi/\varepsilon, 0)$ имеем

$$\sin\frac{Q\pi}{\varepsilon} = \pm\sqrt{\cos^2\delta\,\sin^2\gamma + \sin^2\delta\,\sin^2\beta}. \tag{6}$$

Свяжем параметры δ, β, γ с параметрами задачи (5), предположив

$$|F| \gg |\Delta/2|. \tag{7}$$

Условие (7) дает возможность решать (5) по адиабатической теории возмущений везде, кроме окрестности точки $t \sim \pi/2\varepsilon$. Но при выполнении (7) диабатические термы задачи (5) в указанной окрестности близки к линейным и для расчета динамической фазы и вероятности неадиабатического перехода можно воспользоваться моделью Ландау—Зинера. Согласно [9], имеем

$$\cos\delta = \exp\{-\pi\alpha\}, \quad \gamma = 0, \quad \beta = \Phi + \Psi. \tag{8}$$

Здесь $\alpha = \Delta^2/8F\varepsilon$, $\Psi = \pi/4 + \alpha\ln\alpha - \alpha - \arg\Gamma(1 + i\alpha)$ — динамическая фаза, $\Phi = \int\limits_0^{\pi/\varepsilon} \sqrt{F^2\cos^2\varepsilon t + \Delta^2/4}\,dt$ — адиабатическая фаза. Согласно (6), (8),

$$\sin\frac{Q\pi}{\varepsilon} = \pm\sqrt{1 - \exp\{-2\pi\alpha\}}\,\sin(\Psi + \Phi). \tag{9}$$

Еще одно приближение для Q можно получить по обычной теории возмущений по Δ [при выполнении (7)] [3, 2]. Имеем

$$\gamma = 0, \quad \beta = \pi/2, \quad \sin\delta = \frac{\pi\Delta}{2\varepsilon} J_0\left(\frac{2F}{\varepsilon}\right). \tag{10}$$

Или из (6), (10)

$$\sin\frac{Q\pi}{\varepsilon} = \pm\frac{\pi\Delta}{2\varepsilon} J_0\left(\frac{2F}{\varepsilon}\right). \tag{11}$$

Здесь $J_0(x)$ — функция Бесселя.

Формула (9) лучше согласуется с точным расчетом [3], чем (11).

Можно привести пример точно решаемой задачи, обладающей $\hat{C}$-симметрией. Действительно, для взаимодействия вида

$$\hat{V}(t) = f(t)\,\hat{\sigma}_x,$$

$$f(t) = \begin{cases} 1 & n\tau < t < n\tau + \tau/2, \\ -1 & n\tau + \tau/2 < t < (n+1)\tau, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2\ldots \end{cases} \tag{12}$$

(прямоугольные импульсы), точное выражение для квазиэнергий задачи (1), (12) следующее:

$$\sin\frac{Q\tau}{2} = \pm\frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + 4F^2}}\sin\left(\sqrt{\Delta^2 + 4F^2}\cdot\tau/4\right). \tag{13}$$

Формулы (9), (11), (13) подтверждают свойства 1, 2, 3, выведенные из $\hat{C}$-симметрии.

Выполнение условия (7) можно обеспечить в случае бигармонического поля [6]. Поэтому осциллирующее поведение квазиэнергий, показанное на рисунке, должно проявляться в спектре поглощения при взаимодействии с таким полем (на частоте одного из полей). Квазиуровни в многоуровневом случае должны классифицироваться как с учетом симметрии невозмущенного гамильтониана, так и с учетом $\hat{C}$-симметрии [10].

Литература

[1] Я. Б. Зельдович. Усп. физ. наук, *110*, 139, 1973.
[2] J. H. Shirley. Phys. Rev., *138B*, 979, 1965.
[3] A. G. Fainshtein, N. L. Manakov, L. P. Rapoport. J. Phys. B, *11*, 2561, 1978.
[4] А. О. Меликян. Квант. электрон., *4*, 429, 1977.
[5] А. М. Бонч-Бруевич, В. А. Ходовой, Н. А. Чигирь. ЖЭТФ, *67*, 2069, 1974.
[6] А. М. Бонч-Бруевич, Т. А. Вартанян, Н. А. Чигирь. ЖЭТФ, *77*, 1899, 1979.
[7] H. Sambe. Phys. Rev., *A*, 7, 2203, 1973.
[8] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. Физматгиз, М., 1963.
[9] Е. Е. Никитин, С. Я. Уманский. Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях. Атомиздат, М., 1979.
[10] В. Г. Бордо, А. А. Киселев. Опт. и спектр., *49*, в. 3, 1980.

Поступило в Редакцию 21 марта 1980 г.

УДК 539.194.01

О КЛАССИФИКАЦИИ КВАЗИЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛЫ

В. Г. Бордо и *А. А. Киселев*

Состояния молекулы, помещенной в монохроматическое электромагнитное поле, определяются нестационарным уравнением Шредингера с гамильтонианом $H(t)$, периодически зависящим от времени: $H(t+\tau)=H(t)$, $\tau=2\pi/\omega$, ω — частота электромагнитного поля. Согласно теореме Флоке [1], такое уравнение имеет частные решения вида

$$\Psi(x, t)=e^{-i\mathcal{E}t}U(x, t), \quad U(x, t+\tau)=U(x, t), \tag{1}$$

где $x=(r, R)$ представляет собой совокупность электронных и ядерных координат. Константу $\mathcal{E}$ называют квазиэнергией, а решения (1) — квазиэнергетическими состояниями (КЭС). КЭС широко используются для исследования взаимодействия атомов и молекул с электромагнитным полем [2-6].

Периодические функции $U(x, t)$ удовлетворяют уравнению на собственные значения

$$\mathcal{H}U(x, t)=\mathcal{E}U(x, t) \tag{2}$$

с оператором

$$\mathcal{H}=H+V(t)-i\frac{\partial}{\partial t},$$

где H — гамильтониан молекулы, $V(t)=-(\mathbf{d}, \mathbf{E}_0)\cos\omega t$ — оператор дипольного взаимодействия молекулы с полем. Оператор $\mathcal{H}$ эрмитов в пространстве $R\oplus T$ со скалярным произведением

$$\langle\langle u, v\rangle\rangle=\frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt\int dx u^*(x, t)\, v(x, t),$$